

O-2

カリウム原子でM殻が
最大収容数の電子で満たされる前に
N殻に電子が収容されるのはなぜなのか
－高等学校理科「化学」で
DV-X α 法を使うための eduDV の改訂－

(岡山理科大学 教育推進機構 基盤教育センター) 坂根弦太

**Why are electrons accommodated in the N-shell before the M-shell is filled
with the maximum number of accommodated electrons in a potassium atom?**

**－Revision of eduDV for using the DV-X α method
in "Chemistry" in Higher School－**

Genta Sakane*

Center for Fundamental Education,
Institute for the Advancement of Higher Education,
Okayama University of Science,
1-1 Ridai-cho, Okayama 700-0005, Japan

*E-mail: gsakane@ous.ac.jp

Based on the guidelines for the course of study in high school published by the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology (MEXT) in 2018, classes in high school have been based on the new textbooks since the third year of high school in the 2024 school year. The undergraduate college students who will enter the university in April 2025 have studied in high school with the new course chemistry textbooks and have some knowledge of atomic orbitals. I report on the revision of eduDV, a molecular orbital calculation system using the DV-X α method, to enable high school students to easily calculate the electronic structure of atoms and molecules and visualize them in three dimensions with the three-dimensional visualization program VESTA.

1. はじめに

文部科学省が 2018 年（平成 30 年）に告示した高等学校学習指導要領に基づき，高等学校では 2024 年度の高校 3 年生から，新課程の教科書に基づいた授業が行われている。文部科学省の高等学校学習指導要領解説「理科編 理数編」（2018 年（平成 30 年）7 月，2021 年（令和 3 年）8 月一部改訂）¹⁾ の「第 1 部 理科編」－「第 2 章 理科の各科目」－「第 5 節 化学」－「3 内容とその範囲，程度」－「(3) 無機物質の性質」－「⑦ 典型元素について」の箇所には，

原子の電子配置については，カリウム原子では，M殻が最大収容数の電子で満たされる前にN殻に電子が収容される理由や，塩化物イオンでは，M殻が最大収容数の電子で満たされていないにもかかわらず安定に存在できる理由に触れることも考えられる。

と解説されている。

今回、実教出版、東京書籍、啓林館、数研出版、第一学習社の新課程「化学基礎」「化学」の教科書を取り寄せて確認したところ、「化学基礎」の教科書において「電子軌道とカリウム原子の電子配置」というようなコラムで、1s 軌道、2s 軌道、2p 軌道、3s 軌道、3p 軌道、3d 軌道、4s 軌道、4p 軌道、4d 軌道、4f 軌道の取り扱いが見られた。

これまで大学では 1 年生を対象とした教養系の化学の授業で原子の内部構造を扱うとき、ラザフォードの原子モデル（太陽の周りを惑星が円を描いてぐるぐる回っているように原子核の周りを電子が円を描いてぐるぐる回っているモデル）に凝り固まっている大学 1 年生に対して、シュレディンガー方程式の解である波動関数を紹介したとき、大学 1 年生の混乱と拒否反応は強烈であった。しかし、旧課程で学んできた学生は誰も原子軌道を知らないの、受講生全員に対して「高校ではボーアモデルを習ったが大学ではシュレディンガーモデルを説明するのだ」と、一律に授業を構成することができた。

ところが 2025 年 4 月には、高校では「新課程の教科書」で化学を学んだ学生が入学してくる。果たして 2025 年 4 月に入学してくる大学生は、ボーアモデルと原子軌道の関係（すなわち、原子軌道を主量子数の値で分類した電子の収容場所が電子殻であること）をどれくらい理解しているのであろうか。新課程の「化学」教科書で原子軌道の取り扱いが「コラム」扱いであることから、高校で原子軌道（原子の波動関数）を学んだ学生と学ばなかった学生が混在し、大学の教養系化学の授業では、かえって混乱をきたさないであろうか。

そこで今回、その混乱を回避することを目的として、高等学校の教育現場で周期表の全元素に対して、質の良い原子軌道を出力することができる DV-X α 法の有効活用を目指し、eduDV²⁾の修正を行ったので報告する。

2. 岡山理科大学での化学の授業

筆者は 2005 年度より現在に至るまで、岡山理科大学での化学の授業で、DV-X α 法を用いて原子や分子の電子状態を計算し、原子軌道や分子軌道を三次元可視化する実習を行っている。³⁾ 高校の化学で、原子核の周りを、まるで太陽の周りを周回する惑星のように、電子がぐるぐる回っているイメージを持っている大学 1 年生は、原子モデルの学習段階としてはラザフォードの原子モデルの段階、あるいは K 殻、L 殻、M 殻、N 殻を意識していればボーアモデルの段階にあり、大学の化学の授業でシュレディンガーモデルが登場してくると戸惑っていた。

3. 文部科学省の高等学校学習指導要領

文部科学省によって 2018 年に高等学校学習指導要領が告示され、2022 年度の高校 1 年生から、新課程の教科書で化学を学んでいる。2024 年度現在、高校 3 年生の学年である。化学での主な変更点は、例えば以下のとおりである。

- ・昇華の逆過程は“昇華”ではなく“凝華”
- ・18 族元素は“希ガス”ではなく“貴ガス”
- ・標準状態→0°C, 1.013×10⁵ Pa
- ・アルカリ土類金属：Be と Mg も加える（2 族元素廃止）
- ・遷移元素：“3～11 族” → “3～12 族”（12 族：Zn, Cd, Hg）

- ・水酸化鉄(III)は $\text{Fe}(\text{OH})_3$ ではない、 $\text{Fe}(\text{OH})_3$ 使用禁止
- ・アボガドロ定数は 1 mol の粒子数ではない
(1 mol の ^{12}C は 12 g ではない(11.9999999958 g))
- ・熱化学方程式廃止、化学反応式にエンタルピー変化を併記
- ・カリウム原子で M 殻満員前に N 殻に電子が入る理由

文部科学省の高等学校学習指導要領解説「理科編 理数編」(2018 年(平成 30 年)7 月, 2021 年(令和 3 年)8 月一部改訂)¹⁾の「第1部 理科編」―「第2章 理科の各科目」―「第5節 化学」―「3 内容とその範囲, 程度」―「(3) 無機物質の性質」―「㊦典型元素について」の箇所では,

原子の電子配置については、カリウム原子では、M殻が最大収容数の電子で満たされる前にN殻に電子が収容される理由や、塩化物イオンでは、M殻が最大収容数の電子で満たされていなくても安定に存在できる理由に触れることも考えられる。

と解説されている。

同じく「第1部 理科編」―「第2章 理科の各科目」―「第5節 化学」―「3 内容とその範囲, 程度」―「(4) 有機物質の性質」―「㊦炭化水素について」の箇所では,

炭素原子の電子配置の資料を示して、メタンが正四面体形である理由について、電子配置と構造とを関連付けて触れることも考えられる。

と解説されている。

さらに「第2部 主として専門学科において開設される教科「理数」編」―「第2章 理数科の各科目」―「第5節 理数化学」―「3 内容とその取扱い」―「(2) 物質の構成」の箇所では,

物質の構成については、物質の構成粒子、物質と化学結合などを扱い、必要に応じてこれらの内容を発展、拡充させる。例えば、電子の軌道と分子の形などが考えられる。

と解説されている。

4. 新課程「化学基礎」・「化学」教科書

学習指導要領の解説の記述の変更により, 例えば啓林館の新課程「化学」教科書⁴⁾では, 「第3部 無機物質」―「第1章 周期表と元素の分類」―「第1節 周期表と元素の分類」で「参考 電子の軌道と周期表」㊦電子殻と電子の軌道, ㊧電子の軌道と周期表の位置といった項で, s 軌道(球形), p 軌道(亜鈴形), d 軌道, f 軌道の形や, 2p 軌道には $2p_x$ 軌道, $2p_y$ 軌道, $2p_z$ 軌道があること, 3p 軌道には $3p_x$ 軌道, $3p_y$ 軌道, $3p_z$ 軌道があること, 原子はエネルギーの低い軌道から, $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4d \cdots$ の順に電子を収容するので, K や Ca は 3d 軌道をあけたまま 4s 軌道に電子を収容すること, s ブロック元素(1~2 族元素)が s 軌道に電子が埋まっていく元素群, p ブロック元素(13~18 族元素)が p 軌道に電子が埋まっていく元素群, d ブロック元素(3~12 族元素)が d 軌

道に電子が埋まっていく元素群、f ブロック元素（ランタノイドおよびアクチノイド元素）が f 軌道に電子が埋まっていく元素群であり、それが理由で周期表が段差のある形をしていることなどが記載されている。これは旧課程では「発展」であったものが新課程で「本文扱い（参考）」となったもので、高校の新課程の化学の授業では「K 殻, L 殻, M 殻, N 殻…」と「1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4d…」の関係を生徒に理解させ、原子モデルの学習段階として従来のボーアモデルから、新課程ではシュレーディンガーモデルのイメージを与える必要が出てきたことを意味する。シュレーディンガー方程式を登場させる必要はないが、水素原子についてシュレーディンガー方程式を解いた結果である「1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4d…」のエネルギー準位や波動関数（原子軌道）の姿（実数型球面調和関数の極座標図⁵⁾）をパソコンで容易に計算し、可視化する教育的価値は高いものと思われる。

また、同教科書の「第4部 有機化合物」－「第2章 脂肪族炭化水素」－「第2節 不飽和炭化水素」の「参考 sp^3 混成軌道」で、分子の形や化学反応の理解を助ける混成軌道の理論（ sp^3 混成軌道, sp^2 混成軌道, sp 混成軌道）が紹介されている。これは旧課程では「発展」であったものが新課程で「本文扱い（参考）」となったもので、高校の化学の授業で分子の形の理由を考えるうえで、1s 軌道, 2s 軌道, $2p_x$ 軌道, $2p_y$ 軌道, $2p_z$ 軌道の形を理解したうえで、Linus Pauling の混成結合軌道⁶⁾を学習する必要が出てきたことを意味する。

5. 原子軌道の形

第一学習社の新課程「化学基礎」教科書⁷⁾では、「発展」となっているが、以下の記述がある。

電子殻は、原子軌道(atomic orbital)とよばれる軌道から構成されており、電子はそれらの軌道に存在している。原子軌道には、s 軌道, p 軌道, d 軌道, f 軌道, …がある。

と書いてある。これはすなわち、f 軌道の先にも軌道があることを意味しており、実際に g 軌道, h 軌道, i 軌道と続いていく。

DV- $X\alpha$ 法では、s 軌道, p 軌道, d 軌道, f 軌道だけではなく、5g 軌道, 6h 軌道, 7i 軌道を計算して VESTA⁸⁾で三次元可視化することも容易である。例えば尾上著「量子論の基礎から学べる量子化学」⁵⁾に DV- $X\alpha$ 法で計算し VESTA で描いた水素原子の 1 種類の 1s 軌道、炭素原子の 3 種類の $2p$ 軌道、鉄原子の 5 種類の 3d 軌道、ネオジム原子の 7 種類の 4f 軌道、オガネソン原子の 9 種類の 5g 軌道、オガネソン原子の 11 種類の 6h 軌道、オガネソン原子の 13 種類の 7i 軌道がカラーで掲載されている。この尾上著「量子論の基礎から学べる量子化学」⁵⁾に掲載されている原子軌道の図は DV- $X\alpha$ 研究協会ウェブサイトにも掲載されており、高解像度ファイルをダウンロードできる。⁹⁾

eduDV では、メニューから元素を選ぶだけで、原子番号 1 番の水素原子から 118 番のオガネソン原子まで、DV- $X\alpha$ 法による孤立原子の電子状態計算を実行できる。¹⁰⁾ 計算後は VESTA で容易に原子軌道を三次元可視化できる。

6. 分子の形と電子状態

Linus Pauling の混成軌道について、筆者は岡山理科大学の基盤教育科目「基盤化学 1」

で、eduDV によって水素原子の 1s 軌道、炭素原子の 1s 軌道、2s 軌道、2p_x 軌道、2p_y 軌道、2p_z 軌道の形を十分に理解させたのち、風船を使ってメタン、エタン、エチレン、アセチレン分子の形が Linus Pauling の混成軌道で説明できることを演示している（写真）。

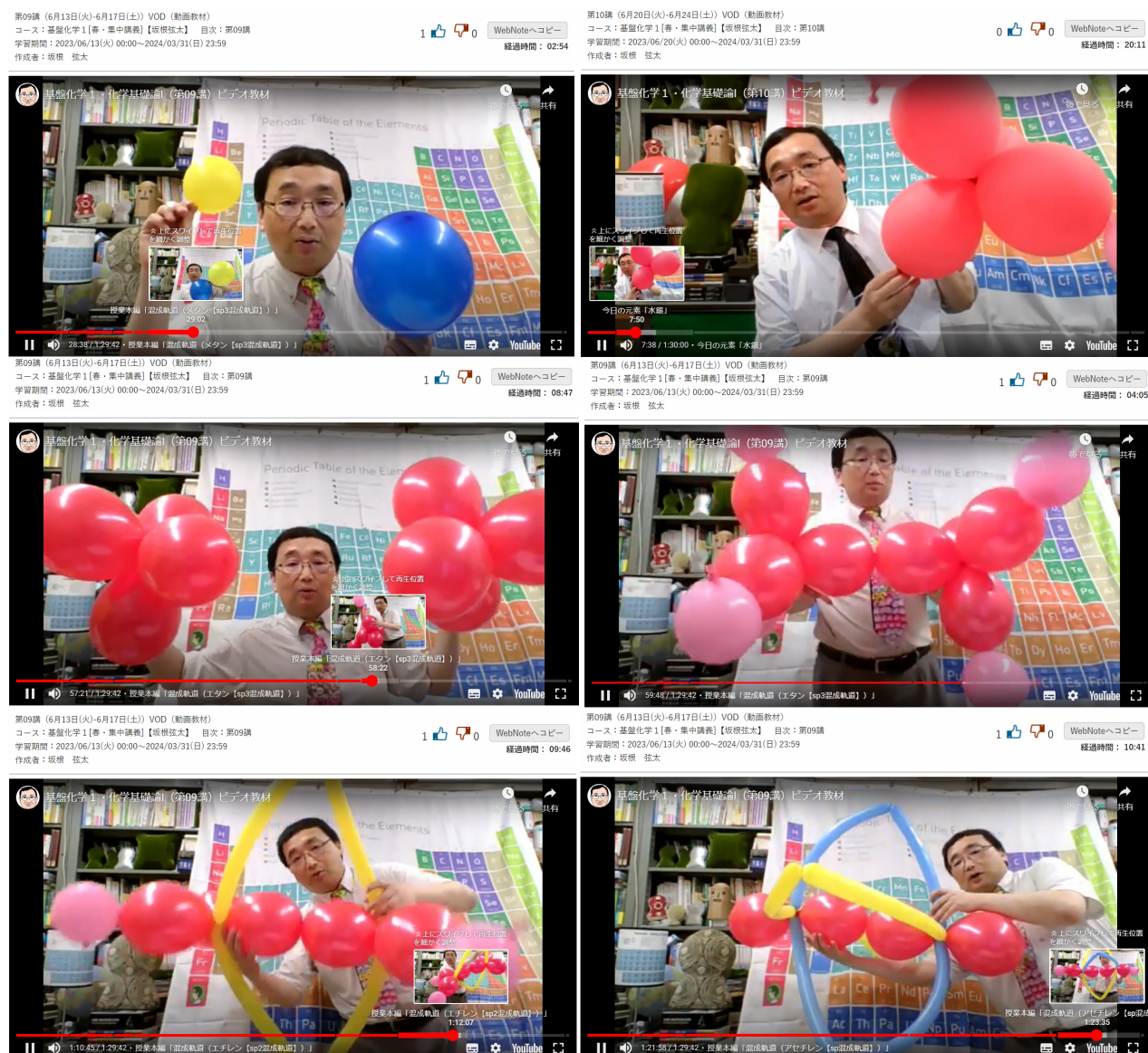


写真. 風船を使って sp 混成, sp² 混成, sp³ 混成を説明する

eduDV を使えば原子番号 1 番の水素から 118 番のオガネソンまで、全ての元素を自由に使って様々な分子の電子状態を DV-X α 法によって計算できる。¹¹⁾ また計算後は VESTA で容易に分子軌道を三次元可視化できる。学習段階として Linus Pauling の混成軌道は有機分子の形の理解に有用であるが、周期表全元素を対象とした無機分子の電子状態は分子軌道法で計算して分子軌道で理解する必要がある。eduDV なら高校にある Windows パソコンで、高校生でも容易に分子軌道計算と分子軌道の三次元可視化ができる。

7. 現行バージョンの eduDV の問題点

2006 年当時の eduDV は、例えばブーメラン型の C_{2v} 対称の分子（例：H₂O）の場合、c2v12n（ノンスピ版）または c2v12s（スピ版）のプログラムを起動後、2 種類の元素の原子番号、原子間距離、原子間角度を会話式で入力することにより、F01 と F25 が作成

され、自動的に DV-X α 計算が行われる仕組みであった。²⁾ C_{2v} 対称の ①c2v12 以外にも、のちに開発したプログラムも含めて、C_{3v} 対称の ②c3v13、D_{3h} 対称の ③d3h13、D_{4h} 対称の ④d4h14、D_{6h} 対称の ⑤d6h66、D_{∞h} 対称の ⑥d8h2、⑦d8h12、⑧d8h22、C_{∞v} 対称の ⑨c8v11、⑩c8v111、⑪c8v1111、T_d 対称の ⑫ml4、⑬td14、⑭td144、O_h 対称の ⑮ml6、⑯oh16、⑰oh166、D_{2h} 対称の ⑱mh2o6、⑲d2h24¹²⁾、D_{3d} 対称の ⑳d3d26¹³⁾と 20 種類のプログラムが用意されていた。

孤立原子の F01 と F25 を準備するプログラム ⑳atom、孤立イオンの F01 と F25 を準備するプログラム ㉑ion を含め、22 種類のプログラムは 2007 年に秀丸エディタをプラットフォームとする DV-X α 法計算支援環境^{14,15)} に搭載され、Graphical User Interface(GUI)で操作することができるようになった。¹⁶⁾

eduDV では、分子軌道を計算しようとする分子の形（点群）を選び、必要最低限の情報（分子を構成する原子の原子番号、原子間距離、原子間角度、酸化数）をキーボードから入力する必要があった。そこで 2013 年、eduDV にデータ自動入力機能「Auto-eduDV」を実装した。¹⁷⁾ これは予め化学便覧¹⁸⁾ に掲載されている構造定数に基づいた 137 種類の分子のデータ（原子番号、原子間距離、原子間角度、酸化数）を eduDV に内蔵しておき、GUI で分子の形（点群）を選んだあと、分子を選ぶだけで DV-X α 計算が実行され、分子軌道を VESTA で三次元可視化できるものである。

しかしこの eduDV を高校生が使うとき、C_{2v} であつたり、C_{3v} であつたり、T_d であつたり、O_h であつたりと、分子の属する点群の知識がない場合は eduDV を使いこなせない。

8. 高校生向け改訂版 eduDV¹⁹⁾

分子の属する点群の知識なしに、原子の波動関数（原子軌道）や分子の波動関数（分子軌道）を DV-X α 法で計算して VESTA で三次元可視化できるように、eduDV のメニューを改訂した。改訂後の eduDV.mac を図 1 に、eduDV.mac の実行画面を図 2 に示す。

```

1 $s = searchbuffer;↓
2 #f = searchoption;↓
3 ↓
4 menu↓
5 "01. 化合物名（化学式）で分子を選択（二原子分子）... ",↓
6 "02. 化合物名（化学式）で分子を選択（単体および無機分子）... ",↓
7 "03. 化合物名（化学式）で分子を選択（有機化合物）... ",↓
8 "04. 化合物名（化学式）で分子を選択（錯体）... ",↓
9 "05. 化合物名（化学式）で分子を選択（有機金属化合物）... ",↓
10 "06. 点群で分子を選択（構造定数自動入力）... ",↓
11 "07. 点群で分子を選択（構造定数会話式手入力）... ",↓
12 "08. 孤立原子（情報自動入力）... ",↓
13 "09. 孤立原子（情報会話式手入力）... ",↓
14 "10. 孤立イオン（情報自動入力）... ",↓
15 "11. 孤立イオン（情報会話式手入力）... ",↓
16 ↓
17 if(result==1)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥01menu.mac";↓
18 else if(result==2)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥02menu.mac";↓
19 else if(result==3)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥03menu.mac";↓
20 else if(result==4)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥04menu.mac";↓
21 else if(result==5)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥05menu.mac";↓
22 else if(result==6)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥06menu.mac";↓
23 else if(result==7)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥07menu.mac";↓
24 else if(result==8)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥08menu.mac";↓
25 else if(result==9)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥09menu.mac";↓
26 else if(result==10)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥10menu.mac";↓
27 else if(result==11)execmacro macrodir + "¥¥eduDV¥¥11menu.mac";↓
28 setsearch $s, #f;↓
29 ↓

```

図 1. 改訂後の eduDV.mac

大学の教育現場や研究用途にも使えるように、従来の「点群で分子を選択」画面も残してある。高校生向けには ③ 二原子分子、②単体および無機分子、③有機化合物、④錯体、⑤有機金属化合物の 5 種類の選択肢を設けた。

```

01. 化合物名（化学式）で分子を選択（二原子分子）...
02. 化合物名（化学式）で分子を選択（単体および無機分子）...
03. 化合物名（化学式）で分子を選択（有機化合物）...
04. 化合物名（化学式）で分子を選択（錯体）...
05. 化合物名（化学式）で分子を選択（有機金属化合物）...
06. 点群で分子を選択（構造定数自動入力）...
07. 点群で分子を選択（構造定数会話式手入力）...
08. 孤立原子（情報自動入力）...
09. 孤立原子（情報会話式手入力）...
10. 孤立イオン（情報自動入力）...
11. 孤立イオン（情報会話式手入力）...

```

図 2. 改訂後の eduDV.mac 実行画面

例えば図 2 で「02. 化合物名（化学式）で分子を選択（単体および無機分子）…」をクリックすると、02menu.mac が実行される。02menu.mac を図 3 に、実行画面を図 4 に示す。

```

1 $s = searchbuffer;↓
2 #f = searchoption;↓
3 ↓
4 menu↓
5 "02-001. イソシアン酸(isocyanic acid, HNCO, CAS[75-18-3])",↓
6 "02-002. イソチオシアン酸(isothiocyanic acid, HNCS, CAS[3129-60-6])",↓
7 "02-003. ニトロキシル(nitroxyl, HNO, CAS[14332-28-6])",↓
8 "02-004. 亜硝酸(nitrous acid, HNO2, CAS[7782-77-6])",↓
9 "02-005. 硝酸(nitric acid, HNO3, CAS[7697-37-2])",↓
10 "02-006. アジ化水素(hydrogen azide, HN3, CAS[7782-79-8])",↓
11 "02-007. ヒドロペルオキシラジカル(hydroperoxyl radical, HO2, CAS[3170-83-0])",↓
12 "02-008. モノクロラミン(monochloramine, NClH2, CAS[10599-90-3])",↓
13 "02-009. ヒドロキシルアミン(hydroxylamine, NH2OH, CAS[7803-49-8])",↓
14 "02-010. 塩化ニトロシル(nitrosyl chloride, NOCl, CAS[2696-92-6])",↓
15 "02-011. フッ化ニトロシル(nitrosyl fluoride, NOF, CAS[7789-25-5])",↓
16 "02-012. 三酸化二窒素(dinitrogen trioxide, N2O3, CAS[10544-73-7])",↓
17 "02-013. 一酸化二硫黄(disulfur monoxide, S2O, CAS[20901-21-7])",↓
18 "【次の頁へ】",↓
19 ↓
20 if(result=1)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-001.mac";↓
21 else if(result=2)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-002.mac";↓
22 else if(result=3)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-003.mac";↓
23 else if(result=4)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-004.mac";↓
24 else if(result=5)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-005.mac";↓
25 else if(result=6)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-006.mac";↓
26 else if(result=7)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-007.mac";↓
27 else if(result=8)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-008.mac";↓
28 else if(result=9)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-009.mac";↓
29 else if(result=10)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-010.mac";↓
30 else if(result=11)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-011.mac";↓
31 else if(result=12)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-012.mac";↓
32 else if(result=13)execmacro macrodir + "YyeduVYY02-013.mac";↓
33 else if(result=14)execmacro macrodir + "YyeduVYY02menu-2.mac";↓
34 setsearch $s, #f;↓
35 endmacro;↓

```

図 3. 改訂後の 02menu.mac

```

02-001. イソシアン酸(isocyanic acid, HNCO, CAS[75-18-3])
02-002. イソチオシアン酸(isothiocyanic acid, HNCS, CAS[3129-60-6])
02-003. ニトロキシル(nitroxyl, HNO, CAS[14332-28-6])
02-004. 亜硝酸(nitrous acid, HNO2, CAS[7782-77-6])
02-005. 硝酸(nitric acid, HNO3, CAS[7697-37-2])
02-006. アジ化水素(hydrogen azide, HN3, CAS[7782-79-8])
02-007. ヒドロペルオキシラジカル(hydroperoxyl radical, HO2, CAS[3170-83-0])
02-008. モノクロラミン(monochloramine, NClH2, CAS[10599-90-3])
02-009. ヒドロキシルアミン(hydroxylamine, NH2OH, CAS[7803-49-8])
02-010. 塩化ニトロシル(nitrosyl chloride, NOCl, CAS[2696-92-6])
02-011. フッ化ニトロシル(nitrosyl fluoride, NOF, CAS[7789-25-5])
02-012. 三酸化二窒素(dinitrogen trioxide, N2O3, CAS[10544-73-7])
02-013. 一酸化二硫黄(disulfur monoxide, S2O, CAS[20901-21-7])
【次の頁へ】

```

図 4. 改訂後の 02menu.mac 実行画面

9. 対称性のない分子の原子座標を eduDV に組み込む方法²⁰⁾

図 4 の【002-005 硝酸(nitric acid, HNO₃, CAS[7697-37-2])】を例にとる。化学便覧¹⁸⁾によると、硝酸の構造定数は表 1 に示すとおりである。この構造定数をもとに、硝酸の Z 行列を作成した (図 5)。

```

1 #CSJ, Handbook of Chemistry: Pure Chemistry, 5th ed. maruzen 2004.↓
2 ↓
3 nitric acid #eduDV(Genta Sakane, Okayama Univ. Sci.)↓
4 ↓
5 0 1↓
6 N↓
7 0 1 r1↓
8 H 2 r2 1 a1↓
9 0 1 r3 2 a2 3 a3↓
10 0 1 r4 2 a4 3 a5↓
11 Variables:↓
12 r1= 1.410↓
13 r2= 0.941↓
14 r3= 1.198↓
15 r4= 1.213↓
16 a1= 102.6↓
17 a2= 114.1↓
18 a3= 180↓
19 a4= 115.7↓
20 a5= 0↓
21 ↓

```

図 5. 硝酸の Z 行列

表 1. 硝酸の構造定数

O _c —H	0.941 Å
N—O _c	1.410 Å
N—O _a	1.198 Å
N—O _b	1.213 Å
∠HO _c N	102.6 °
∠O _c NO _a	114.1 °
∠O _c NO _b	115.7 °

DV-Xα法プログラム²¹⁾には Z 行列を読み込む機能がないため、Z 行列を DV-Xα法プログラムが読み込める直交座標に変換する必要がある。Open Babel²²⁾は 110 種類を超える書式を読み書きでき、gzmat 書式 (Gaussian Z-matrix Input, Z 行列) と xyz 書式 (Cartesian coordinates format, 直交座標) に対応しているため、図 5 の Z 行列を xyz 書式に容易に変換できる。また、DV-Xα法計算支援環境^{14,15)}には xyz 書式を f01 の変換するプログラム xyz2f01.exe が組み込まれているため、xyz 書式から F01 を容易に作成できる。

10. おわりに

DV-X α 法の原子軌道設定ファイル nonrel を改訂²³⁾し、eduDV で使用する対称軌道に symOrb²⁴⁾ で g 軌道 (方位量子数: 4), h 軌道 (方位量子数: 5) を追記²⁵⁾したことにより、eduDV では原子番号 1 番の水素から原子番号 118 番のオガネソンまで、孤立原子の電子状態を計算して原子軌道を三次元可視化でき、化学便覧¹⁸⁾に構造定数が掲載されている分子をメニューから選んで電子状態を計算し、分子軌道を三次元可視化できるようになった。現在、化学便覧¹⁸⁾に構造定数が掲載されている 221 種類の分子のうち、すでに 85 種類の分子は eduDV に組み込んであるが、まだ 136 種類の分子の組み込みが終わっていない。高等学校理科の新課程教科書「化学基礎」・「化学」に登場してくるすべての分子を eduDV に組み込み、点群の知識なしに計算したい原子、分子をメニューから選択することにより、原子・分子の電子状態を計算し、原子軌道・分子軌道を三次元可視化できるようにする予定である。eduDV を含む DV-X α 法計算支援環境は無償で Windows パソコンに環境が構築できるため、高等学校でこの計算・可視化環境の普及を目指したい。

文献

- 1) https://www.mext.go.jp/content/20211102-mxt_kyoiku02-100002620_06.pdf
- 2) 坂根弦太, “DV-X α 分子軌道計算プログラムと三次元可視化システム VENUS の大学基礎化学教育での活用”, 日本教育情報学会第 22 回年会 (岡山) 論文集, 2D3, 198-199 (2006).
- 3) 坂根弦太, 森義裕, “教育用分子軌道計算システム eduDV の教育現場への活用”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **41/42**, 9-28 (2022). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2997>
- 4) 井本英夫, 尾中篤, 松村道雄編, “高等学校 化学”, 文部科学省検定済教科書 高等学校理科用 **61 啓林館 化学 705** 令和 4 年 3 月 1 日検定済, 令和 5 年度用.
- 5) 尾上順, “量子論の基礎から学べる量子化学”, p. 80-86[5.4 水素原子の波動関数], 近代科学社 (2012).
- 6) ポーリング著, 小泉正夫訳, “化学結合論 [改訂版]”, 10 刷, p. 98-106[4・2 混成結合軌道, 四面体型炭素原子], 共立出版 (1969).
- 7) 山内薫, “高等学校 化学基礎”, 文部科学省検定済教科書 高等学校理科用 **183 第一 化基 711** 令和 5 年 2 月 10 日発行.
- 8) K. Momma and F. Izumi, “VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data”, *J. Appl. Crystallogr.*, **44**, 1272-1276 (2011). <https://doi.org/10.1107/S0021889811038970>
- 9) s 軌道, p 軌道, d 軌道, f 軌道: <https://www.dvxa.org/hme/AO/>
g 軌道: <https://www.dvxa.org/hme/5g/> h 軌道: <https://www.dvxa.org/hme/6h/> i 軌道: <https://www.dvxa.org/hme/7i/>
- 10) 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(7)”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **37**, 1-16 (2016). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2979>
- 11) 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(8)”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **38**, 1-20 (2017). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2982>
- 12) 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(2)”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **32**, 11-36 (2011). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2947>
- 13) 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(3)”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **33**, 1-31 (2012). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2954>
- 14) 門馬綱一, 泉富士夫, 坂根弦太, *DV-X α 研究協会会報*, **20**, 252-253 (2007).
- 15) 坂根弦太, 門馬綱一, 泉富士夫, *DV-X α 研究協会会報*, **21**, 13-17 (2008).
- 16) 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **31**, 9-17 (2010). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2937>
- 17) 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(4)”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **34**, 1-37 (2013). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2961>
- 18) 日本化学会編纂, 化学便覧基礎編 改訂 5 版, 第 II 巻, 16.1 分子構造, 表 16.3 有機化合物の構造定数, p. II-802, 808, 丸善 2004 年.
- 19) 坂根弦太, 森義裕, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(10)”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **40**, 11-30 (2019). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2991>
- 20) 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(9)”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **39**, 1-20 (2018). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2986>
- 21) 足立裕彦, 小笠原一禎, 小和田善之, 坂根弦太, 水野正隆, “新版 はじめての電子状態計算 —DV-X α 分子軌道計算への入門—”, 三共出版 2017 年.
- 22) Noel M O'Boyle, Michael Banck, Craig A James, Chris Morley, Tim Vandermeersch, Geoffrey R Hutchison, “Open Babel: An open chemical toolbox”, *Journal of Cheminformatics*, 3:33 (2011). <https://doi.org/10.1186/1758-2946-3-33>
- 23) 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(5)”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **35**, 1-32 (2014). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2967>
- 24) 足立裕彦監修, 小和田善之, 田中功, 中松博英, 水野正隆, “はじめての電子状態計算 ■DV-X α 分子軌道計算への入門■”, 三共出版 1998 年.
- 25) 坂根弦太, “教育用分子軌道計算システム eduDV の開発(6)”, 岡山理科大学情報処理センター研究報告, **36**, 1-18 (2015). <https://ous.repo.nii.ac.jp/records/2973>